

IMPORTÂNCIA DA ESPECTROSCOPIA DE UTRAVIOLETA NA FOTODEGRADAÇÃO DE CONTAMINANTES ORGÂNICOS PERSISTENTES UTILIZANDO NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO METÁLICO DE TiO_2 E ZnO : UMA REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Danilo Costa dos Santos*

Alberthmery Teixeira de Figueiredo*

Cristiano Morita barrado*

Resumo: Os índices de poluição ambiental têm apresentado crescimento expressivo, afetando a atmosfera, os solos e os corpos hídricos. Entre os principais agentes, destacam-se os Poluentes Orgânicos Persistentes (POPs), compostos de elevada estabilidade química, baixa biodegradabilidade e alta toxicidade, os quais, quando introduzidos no meio ambiente, ocasionam efeitos deletérios à biota, interferindo em processos ecológicos essenciais, como reprodução e manutenção de espécies. Nesse contexto, a busca por metodologias eficazes para a mitigação e/ou eliminação desses poluentes configura-se como prioridade no campo da remediação ambiental. Entre as tecnologias emergentes, a fotodegradação por meio de Processos Oxidativos Avançados (POAs) tem se consolidado como alternativa promissora. Para utilização dessa tecnologia a radiação ultravioleta (UV) é essencial, atuando tanto como agente indutor das reações dos semicondutores metálicos (TiO_2 e ZnO), que promove a formação de espécies altamente reativas ($\bullet\text{OH}$). Quando como ferramenta de monitoramento, permite monitorar a concentração residual de poluentes e avaliar a eficiência da degradação obtida. O uso da radiação UV não gera subprodutos indesejáveis em quantidades significativas, tornando o processo ambientalmente mais sustentável.

Palavras-chave: Fotocatálise; Nanopartículas; Poluentes orgânicos; Espectroscopia; UV-vis.

INTRODUÇÃO

Os avanços tecnológicos e industriais observados ao longo das últimas décadas promoveram o desenvolvimento socioeconômico e o aperfeiçoamento das civilizações. Entretanto, tais progressos também intensificaram a emissão e o acúmulo

* Instituto de Química – UFCAT: prof.quimca.danilo@gmail.com;
alberth@ufcat.edu.br;
cristiano@ufcat.edu.br.

de substâncias químicas no meio ambiente, ocasionando efeitos adversos aos ecossistemas e à saúde humana (PASQUINI, 2020). Esse cenário é particularmente preocupante diante do fato de que cerca de 50% da população mundial atualmente reside em áreas urbanas, onde a exposição a elevados níveis de poluentes atmosféricos e aquáticos é recorrente (SANTOS *et al.*, 2019).

Entre os principais agentes contaminantes destacam-se os Poluentes Orgânicos Persistentes (POPs), compostos de elevada estabilidade química, resistência à degradação natural e reconhecida toxicidade. Desde sua ampla utilização a partir da Segunda Guerra Mundial, esses compostos vêm sendo identificados como contaminantes de preocupação global, devido à sua capacidade de bioacumulação e biomagnificação na cadeia trófica, além de seus efeitos carcinogênicos, mutagênicos e disruptores endócrinos (ASHRAF, 2017).

Diante dessa problemática, a comunidade científica tem direcionado esforços ao desenvolvimento de estratégias de remediação ambiental avançadas, com ênfase na degradação de POPs por meio de Processos Oxidativos Avançados (POAs). Entre esses métodos, destaca-se a fotodegradação catalítica, que utiliza nanopartículas de dióxido de titânio (TiO_2) e óxido de zinco (ZnO) como fotocatalisadores sob irradiação ultravioleta. Nessa abordagem, a eficiência do processo é monitorada por espectroscopia de ultravioleta-visível (UV-Vis), técnica que permite acompanhar a diminuição da absorbância característica dos contaminantes e, consequentemente, avaliar a taxa de degradação (NAWAZ *et al.*, 2023).

Assim, o presente estudo tem como objetivo analisar a aplicabilidade e a eficiência da espectroscopia UV-Vis na obtenção de dados referentes à fotodegradação de POPs. A relevância deste tema reside na busca por soluções tecnológicas sustentáveis voltadas à mitigação dos impactos ambientais causados por contaminantes orgânicos persistentes. Para tanto, a pesquisa foi conduzida sob a forma de revisão bibliográfica, de natureza exploratória, com abordagem qualitativa e quantitativa.

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O uso histórico dos Poluentes Orgânicos Persistentes (POPs) está ligado ao avanço tecnológico e à evolução das políticas públicas sobre substâncias químicas. Por décadas, o uso intensivo de pesticidas, compostos industriais e fármacos

resistentes ao metabolismo humano contribuiu significativamente para a contaminação e persistência dessas substâncias no meio ambiente (JONES, 2021; BUSTOS *et al.*, 2024; SOARES, 2024).

Desde 1960, esses poluentes têm sido reconhecidos pela ONU como contaminantes de alcance mundial, com regulamentações internacionais que visam limitar sua presença no ambiente. A inclusão no documento de Convenção de Estocolmo reflete o consenso global sobre os riscos que representam, justificando sua proibição e controle rigoroso (CIPRO, 2011; PASQUINI, 2020; SILVA, 2024; SOARES, 2024).

São compostos orgânicos (pesticidas, produtos industriais, subprodutos não intencionais) produzidos deliberadamente pelo homem ou formados como subprodutos de atividades antrópicas, como a incineração de plásticos e a síntese de solventes orgânicos. E identificá-los se configura como um desafio porque muitos desses compostos são semivoláteis, coeficiente que concede facilidade no seu transporte em longa distância, gerando dificuldades para identificar e analisar as rotas de sua dispersão na atmosfera, correntes oceânicas e cadeia alimentar (CIPRO, 2011; CARRASCOSA *et al.*, 2021; VIANA, 2021; SOARES, 2024; FERREIRA, 2025).

A categoria dos POPs agrupa substâncias químicas que possuem uma atenção global e um grau expressivo de estabilidade e resistência ao se observar a capacidade degradá-los. Por isso, esses compostos apresentam uma maior resistência duradoura quando no meio ambiente, assim, acumulam-se no solo, ar, água e em organismos (CARRASCOSA *et al.*, 2021; CETESB [s. d.]; WHO, 2019; WHO, 2020; SOARES, 2024)

Quando puros, apresentam coloração branca e, em grau técnico, parda. São praticamente insolúveis em água, mas altamente solúveis em solventes orgânicos como acetona, etanol, isopropanol e tricloroetileno, o que contribui para sua ampla dispersão e risco ambiental elevado (BRASIL, 2005; SOARES, 2024).

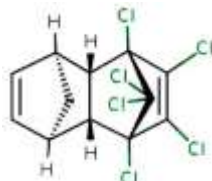
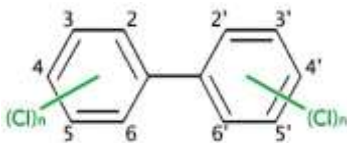
Devido à sua tendência à bioacumulação e aos danos à saúde humana e aos ecossistemas, os POPs foram incluídos nos anexos A, B e C da Convenção de Estocolmo, que proíbe sua produção e uso em escala global. Alguns compostos, como o dieldrin e o mirex, representam preocupações significativas por sua toxicidade e capacidade de se acumular na cadeia alimentar, o que levou à sua restrição severa em diversos países (SOARES, 2024).

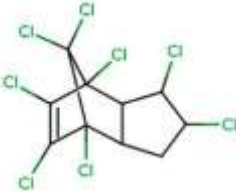
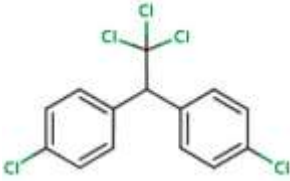
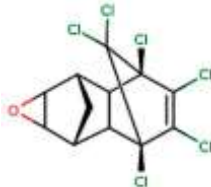
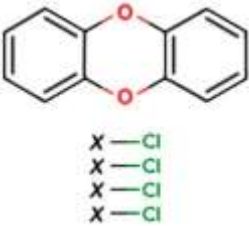
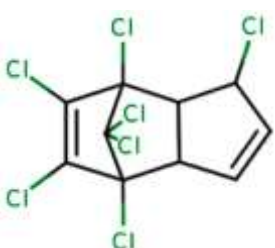
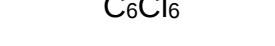
Os seres humanos estão continuamente expostos aos POPs por diferentes vias, como a alimentação, o ar atmosférico e o contato com produtos domésticos e comerciais. Esses compostos têm sido detectados de forma consistente em diversos tecidos humanos, incluindo o pâncreas. Estudos epidemiológicos apontam uma correlação modesta, porém consistente, entre a exposição aos POPs e o aumento do risco de desenvolvimento de diabetes, sugerindo que tais substâncias podem exercer papel relevante em processos metabólicos e endócrinos (HOYECK *et al.*, 2022).

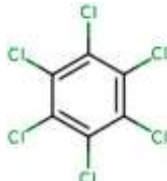
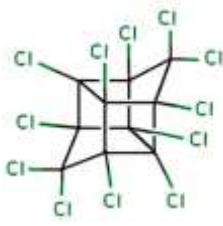
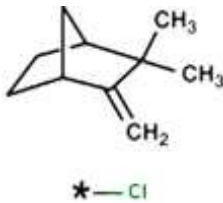
Determinadas categorias de POPs, como as substâncias polifluoroalquílicas (PFAS) e os retardantes de chama bromados (BFRs), apresentam natureza hidrofóbica e elevada afinidade por lipídios, o que favorece sua concentração nos organismos e o acúmulo progressivo ao longo das cadeias tróficas (HOUDE *et al.*, 2011). Essa característica pode resultar em exposição prolongada e, conseqüentemente, em efeitos tóxicos significativos para os seres vivos.

Devido à sua elevada estabilidade, mobilidade ambiental e capacidade de contaminação de diferentes compartimentos, incluindo águas superficiais, subterrâneas e solos, essas substâncias foram reconhecidas pela Convenção de Estocolmo como integrantes do grupo dos Poluentes Orgânicos Persistentes (POPs) (MACH; STRAKOVÁ, 2020). A exemplo os demonstrados na tabela 1.

Tabela 1 – Exemplos de Poluentes Orgânicos Persistentes (POPs)

NOME	FÓRMULA MOLECULAR E ESTRUTURAL	CARACTERÍSTICAS
Aldrin	$C_{12}H_8Cl_6$ 	Pertence ao grupo dos ciclodienos clorados e pode conter impurezas como octaclorociclopentano, hexaclorobutadieno e tolueno, além de subprodutos formados durante sua síntese.
Bifenilas policloradas (PCB)	$C_{12}H_{10-x}Cl_x$ 	São compostos aromáticos clorados sintéticos formados por dois anéis benzênicos, com até 209 congêneres possíveis. Apresentam-se como líquidos oleosos ou sólidos cristalinos, de baixa solubilidade em água, alta solubilidade em solventes orgânicos, alta densidade e elevada estabilidade química e térmica.

Clordano	$C_{10}H_6Cl_8$ 	O clordano é um pesticida organoclorado sintético, constituído por uma mistura de compostos (cis e trans), apresentado como líquido viscoso âmbar, com odor intenso, insolúvel em água e solúvel em solventes orgânicos.
DDT	$C_{14}H_9Cl_5$ 	É um pesticida organoclorado sintético, predominantemente o p,p'-DDT, apresentado como mistura de isômeros, em cristais ou pó branco, com leve odor aromático, baixa solubilidade em etanol e alta solubilidade em solventes orgânicos como acetona e éter etílico.
Dieldrin	$C_{12}H_8Cl_6O$ 	É um pesticida organoclorado sintético, sólido à temperatura ambiente, com baixa solubilidade em água, apresentado como pó branco quando puro e pardo no grau técnico, refletindo sua alta estabilidade química e risco ambiental.
Dioxinas (PCDD)	$C_{12}H_{(8-n)}Cl_nO_2$ 	As dioxinas são POPs não intencionais listados no Anexo C da Convenção de Estocolmo, incluindo CDD, CDF e algumas PCBs. São altamente tóxicas, persistentes e bioacumulativas, sendo a 2,3,7,8-TCDD a forma mais perigosa e um dos poluentes globais mais críticos.
Endrin	$C_{12}H_8Cl_6O$ 	É um pesticida organoclorado sintético, apresentado como sólido cristalino branco (ou marrom-claro na presença de impurezas), com odor ausente ou levemente terpênico, baixa solubilidade em água e alta solubilidade em solventes orgânicos.
Heptacloro	$C_{10}H_5Cl_7$ 	O heptacloro é um pesticida organoclorado sintético, apresentado como pó branco a castanho-claro, com odor semelhante à cânfora, baixa solubilidade em água, alta solubilidade em solventes orgânicos e tendência a afundar em ambientes aquáticos devido à sua elevada densidade.
Hexaclorobenzeno (HCB)	C_6Cl_6 	O HCB é um pesticida organoclorado sintético,

		apresentado como cristais brancos, com alta pureza (~98%), baixa solubilidade em água e que, ao aquecimento, libera gases tóxicos, indicando elevado risco ambiental e à saúde.
Mirex	$C_{10}Cl_{12}$ 	É um pesticida organoclorado altamente persistente, tóxico e com potencial de bioacumulação, apresentado como sólido branco cristalino, de baixa solubilidade em água, solúvel em solventes orgânicos e com tendência a submergir em ambientes aquáticos devido à sua alta densidade.
Toxafeno	$C_{10}H_{10}Cl_8$ 	É um pesticida organoclorado sintético, constituído por uma mistura complexa de compostos clorados. Apresenta baixa solubilidade em água, elevada estabilidade química e alto risco ecológico devido à sua persistência ambiental.

Adaptado de: CETESB [s. d.]

Ainda, os POPs apresentam diferentes níveis de concentração entre os organismos, sendo mais elevados em espécies aquáticas, seguidos por seres humanos, animais terrestres e, por último, plantas. Essas substâncias possuem forte afinidade por lipídios e elevada resistência à degradação natural, o que favorece sua permanência no ambiente e o acúmulo progressivo nos tecidos biológicos. Em razão dessas propriedades, os POPs exercem diversos efeitos tóxicos, podendo atuar como agentes cancerígenos, mutagênicos, neurotóxicos, interferentes hormonais e causadores de distúrbios reprodutivos em múltiplas formas de vida (FERRONATO, 2016).

Evidências científicas indicam que os POPs contribuem para a desregulação da homeostase da glicose, a disfunção das células β pancreáticas e o aumento do estresse metabólico e oxidativo nas ilhotas pancreáticas. Tais resultados reforçam a necessidade de considerar o pâncreas endócrino nas avaliações de toxicidade desses compostos, bem como apontam lacunas significativas na literatura sobre os efeitos específicos da exposição aos POPs *in vivo* e *in vitro*. Além disso, estudos recentes demonstram que esses poluentes representam uma ameaça abrangente aos ecossistemas aquáticos e terrestres, impactando a vida marinha, contaminando

alimentos e favorecendo a disseminação global de substâncias tóxicas (HOYECK *et al.*, 2022; BRAGA; BRAGA, 2023).

Considerando os impactos tóxicos e ambientais provocados pelos POPs, pesquisas recentes têm se voltado ao desenvolvimento de alternativas tecnológicas que promovam sua degradação e minimizem sua permanência no meio ambiente. Diversas estratégias vêm sendo estudadas, com destaque para os processos oxidativos avançados, incluindo fotocatalise, adsorção, eletrocoagulação e reações de Fenton, entre outros métodos inovadores. Apesar das particularidades e restrições de cada técnica, essas abordagens demonstram elevada eficácia na eliminação de compostos recalcitrantes, representando um avanço significativo no tratamento de poluentes persistentes (KUMAR *et al.*, 2022; SOARES, 2024).

Uma característica essencial que torna esses materiais amplamente aplicáveis em estudos de fotodegradação por catálise heterogênea é sua natureza magnética, presente na maioria dos casos. Essa propriedade facilita a separação e recuperação do catalisador ao término dos experimentos. Além disso, quando combinados a outras fases, esses materiais podem formar heterojunções capazes de reduzir a largura da banda proibida, permitindo que a excitação ocorra com menor gasto energético. Como resultado, o sistema experimental torna-se mais simples e eficiente, favorecendo a geração de espécies oxidantes com menor demanda de energia (ZULQARNAIN *et al.*, 2021; JOGI *et al.*, 2022; MAQSOOD *et al.*, 2024; SOARES, 2024).

Nesse contexto, torna-se essencial investir no desenvolvimento e aperfeiçoamento de métodos eficientes voltados à degradação de poluentes emergentes. Entre as tecnologias disponíveis, a fotocatalise tem se destacado nas últimas décadas como uma alternativa promissora para o tratamento de águas residuais, devido às suas vantagens como elevada eficiência, baixo custo de operação e implementação, baixo impacto ambiental e capacidade de minimizar a geração de resíduos. Além disso, sua natureza sustentável e segura reforça seu potencial como uma das principais estratégias para mitigar os efeitos desses contaminantes persistentes (DONG, 2022; COSTA *et al.*, 2024).

O mecanismo da fotocatalise baseia-se na incidência de luz sobre um fotocatalisador semicondutor, cuja energia deve ser igual ou superior ao seu *bandgap*. Essa irradiação promove a excitação de elétrons da banda de valência para a banda de condução, originando pares elétron-lacuna no interior do material. Esses pares

migram até a superfície do semicondutor, onde reagem com moléculas de água e oxigênio, gerando radicais hidroxila ($\bullet\text{OH}$) e outras espécies reativas responsáveis pela oxidação de compostos orgânicos. A técnica apresenta notável eficiência, especialmente na degradação de poluentes altamente estáveis, permitindo sua mineralização completa em CO_2 e H_2O , o que a torna uma alternativa limpa e eficaz para o tratamento de contaminantes persistentes (COSTA *et al.*, 2021; COSTA *et al.*, 2024).

Os dados obtidos evidenciam de forma nítida a eficiência do catalisador empregado na degradação, bem como a funcionalidade do reator fotoquímico desenvolvido. Ressalta-se que o sistema proposto é versátil, permitindo a execução de variados processos, sejam eles de natureza química ou biológica, tornando-o adequado tanto para pesquisas acadêmicas quanto para aplicações industriais e comerciais (COSTA *et al.*, 2024).

MATERIAIS E MÉTODOS

O presente estudo caracteriza-se como uma pesquisa bibliográfica, de natureza básica e exploratória, voltada à problematização e ao aprofundamento do debate científico acerca da temática em análise. Metodologicamente, adota-se uma abordagem qualitativa e quantitativa, sustentada em dados secundários oriundos da literatura especializada (NASCIMENTO, 2016). Os dados foram obtidos a partir da recuperação de documentos indexados, tais como artigos científicos, capítulos de livros e anais de eventos acadêmicos, publicados nos últimos dez anos, e disponíveis em bases de dados de ampla relevância científica, incluindo Google Acadêmico, PubMed, SciELO, Scopus e *Web of Science*.

Para a definição do corpus bibliográfico, foram estabelecidos critérios de inclusão e exclusão. Foram considerados apenas trabalhos publicados no período compreendido entre 2014 e 2025, empregando-se como descritores, em inglês e em língua portuguesa, os termos: “*metal oxide of TiO₂*”, “*metallic oxide of ZnO*”, “*organic contaminants*”, “*photodegradation*”, “*pollutants*”, “*titanium dioxide*” e “*zinc oxide*”, utilizados de forma isolada e combinada. Após a etapa de prospecção, os documentos foram submetidos a um processo de triagem e análise crítica, de modo a selecionar aqueles com maior relevância para subsidiar a fundamentação teórica e a discussão dos resultados apresentados.

RESULTADOS

As nanopartículas de dióxido de titânio (TiO_2) e óxido de zinco (ZnO) são amplamente estudadas como agentes fotocatalíticos devido às propriedades únicas adquiridas quando reduzidas à escala nanométrica, especialmente o aumento da área superficial e as alterações eletrônicas associadas ao confinamento quântico (Herrmann, 2010; Kadhim *et al.*, 2023).

Segundo Mao *et al.* (2024), essas características tornam o TiO_2 e o ZnO materiais altamente eficientes para processos que envolvem absorção de radiação ultravioleta e consequente promoção de pares elétron–buraco (e^-/h^+), essenciais para iniciar reações de oxidação avançada. A atuação dessas nanopartículas no processo de fotocatalise decorre de sua capacidade de gerar espécies reativas de oxigênio, como $\bullet\text{OH}$ e $\text{O}_2\bullet^-$, responsáveis pela degradação de POPs.

A interação entre as nanopartículas e a radiação UV ocorre por meio da excitação eletrônica, permitindo que elétrons migrem da banda de valência para a banda de condução, deixando lacunas positivas capazes de oxidar diretamente compostos orgânicos ou produzir radicais altamente reativos. Veréb *et al.* (2022) destacam que o TiO_2 , especialmente na fase anatase, apresenta maior eficiência fotocatalítica devido ao seu *bandgap* de aproximadamente 3,2 eV, que favorece a ativação sob luz ultravioleta. O ZnO , conforme descrito por Singh e Jyoti (2021), possui comportamento fotocatalítico semelhante, sendo igualmente eficaz para degradação de POPs, embora apresente limitações quanto à estabilidade e possível fotocorrosão em determinados meios.

No contexto da espectroscopia ultravioleta (UV-Vis), essas nanopartículas desempenham papel fundamental ao possibilitar o monitoramento cinético da degradação dos contaminantes. A técnica mede o decaimento da absorbância em função do tempo, permitindo avaliar a eficiência fotocatalítica a partir da redução na concentração do poluente, como apontam Houas *et al.* (2019). Além disso, o uso de espectroscopia UV-Vis de reflectância difusa (DRS) permite determinar o *bandgap* das nanopartículas de TiO_2 e ZnO , o que é essencial para compreender sua capacidade de absorção de luz e prever seu desempenho sob diferentes fontes de radiação.

Entretanto, o uso exclusivo da espectroscopia UV-Vis pode levar a interpretações equivocadas devido a interferências óticas, como turbidez, dispersão

de luz e sobreposição espectral de intermediários de degradação. Por esse motivo, autores como Al-Hammadi e Saleh (2022) recomendam complementar os estudos com técnicas como HPLC, LC-MS e análises de carbono orgânico total (TOC), que permitem identificar produtos intermediários e confirmar a mineralização do contaminante. Dessa forma, a combinação entre nanopartículas de TiO_2 e ZnO e métodos espectroscópicos adequados proporciona uma abordagem eficaz, sustentável e tecnicamente robusta para o tratamento de águas contaminadas por POPs.

A caracterização adequada de nanopartículas de TiO_2 e ZnO é essencial para compreender sua atuação como fotocatalisadores na fotodegradação de POPs, especialmente quando associada à espectroscopia ultravioleta (UV-Vis). Segundo Mao *et al.* (2024), propriedades como morfologia, área superficial, cristalinidade e *bandgap* afetam diretamente a capacidade de absorção de radiação UV e a geração de pares elétron–buraco. Assim, o estudo das nanopartículas não pode ser dissociado das técnicas analíticas que permitem correlacionar suas características estruturais ao desempenho fotocatalítico.

Entre os métodos mais empregados na caracterização, destacam-se técnicas de microscopia, como a Microscopia Eletrônica de Transmissão (TEM) e de varredura (SEM), que permitem avaliar forma, tamanho primário das partículas e seu grau de agregação. Nemiwal *et al.* (2021) ressaltam que essas informações são essenciais para prever a dispersão da luz e possíveis interferências nas medidas de UV-Vis, sobretudo em suspensões coloidais. Complementarmente, a difração de raios X (XRD) é amplamente utilizada para identificar fases cristalinas, como anatase e rutilo no TiO_2 , e calcular o tamanho de cristalito, fatores que, conforme Sharma *et al.* (2022), se relacionam diretamente com a eficiência fotocatalítica observada em processos de fotodegradação.

Além das técnicas estruturais, análises ópticas têm papel central na avaliação de nanopartículas aplicadas à fotocatalise. A espectroscopia UV-Vis de reflectância difusa (DRS) permite determinar o *bandgap* dos materiais, informação crucial para identificar sua faixa de fotoativação, como destacado por Veréb *et al.* (2022). Já a espectroscopia de fotoluminescência (PL) possibilita avaliar a recombinação de cargas, indicando se os elétrons e lacunas gerados permanecem disponíveis para participar de reações redox ou se se recombina rapidamente, reduzindo a eficiência

do processo. Essas técnicas, portanto, complementam-se para descrever o comportamento óptico das nanopartículas durante a exposição à radiação ultravioleta.

Tabela 2 – Métodos de caracterização de nanopartículas de TiO₂ e ZnO

MÉTODO	FINALIDADE NA FOTODEGRADAÇÃO	AUTOR E ANO
UV-Vis (cinética)	Monitoramento da absorbância; cálculo da constante cinética; avaliação da taxa de degradação.	Singh e Jyoti (2021)
HPLC	Quantificação precisa do contaminante e separação dos intermediários formados.	Houas <i>et al.</i> (2019)
GC-MS	Identificação estrutural de intermediários voláteis e produtos finais da degradação.	Al-Hammadi e Saleh (2022)
LC-MS / LC-MS-MS	Identificação de intermediários polares e produtos não voláteis da fotodegradação.	Al-Hammadi e Saleh (2022)
TOC (Carbono Orgânico Total)	Avalia a mineralização completa (conversão para CO ₂).	Veréb <i>et al.</i> (2022)
DQO (Demanda Química de Oxigênio)	Determina a carga orgânica oxidável e complementa o TOC.	Sharma <i>et al.</i> (2022)
EPR/ESR (Spin Trapping)	Identificação de radicais gerados ($\bullet\text{OH}$, $\text{O}_2\bullet^-$) durante a fotodegradação.	Mao <i>et al.</i> (2024)
Testes de Toxicidade (ex: Daphnia)	Avalia toxicidade residual; detecta intermediários tóxicos.	Nemiwal <i>et al.</i> (2021)

A cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC) é essencial para confirmar a degradação química dos contaminantes, já que separa e quantifica tanto o composto original quanto os intermediários formados. Segundo Houas *et al.* (2019), esse método complementa o UV-Vis ao permitir identificar se a redução de absorbância corresponde realmente à degradação molecular ou apenas a reações superficiais. A técnica é especialmente útil em amostras complexas e para POPs que não apresentam absorbância intensa na região UV.

A GC-MS é amplamente empregada para identificar intermediários voláteis e semi-voláteis formados durante a fotocatalise. Al-Hammadi e Saleh (2022) explicam que esse método fornece informações estruturais detalhadas sobre fragmentos gerados no processo, ajudando a mapear possíveis vias de degradação. A combinação com espectrometria de massas aumenta a precisão da identificação, permitindo verificar se produtos tóxicos ou persistentes são formados ao longo do tratamento.

A LC-MS e sua variante de alta sensibilidade, LC-MS-MS, são técnicas cruciais para detectar intermediários polares e compostos não voláteis que não podem ser

analisados por GC-MS. Conforme discutido por Al-Hammadi e Saleh (2022), essa abordagem é necessária para estudos de fotodegradação de fármacos, pesticidas e disruptores endócrinos, pois permite elucidar corretamente estruturas químicas complexas e acompanhar transformações moleculares mais profundas.

A análise de carbono orgânico total (TOC) é fundamental para avaliar a mineralização completa dos contaminantes, diferenciando degradação parcial de total conversão em CO₂. Veréb *et al.* (2022) afirmam que esse método é indispensável, pois a simples diminuição na concentração do poluente não garante que subprodutos tóxicos não estejam sendo formados. Assim, o TOC fornece uma medida real da remoção do carbono orgânico da solução.

A DQO é outro parâmetro amplamente utilizado para medir a quantidade total de matéria orgânica oxidável presente na solução após o processo fotocatalítico. De acordo com Sharma *et al.* (2022), a análise de DQO complementa o TOC e ajuda a verificar a eficiência global da degradação, principalmente em sistemas contendo misturas complexas de compostos orgânicos.

A técnica de EPR/ESR com armadilhamento de spin permite identificar diretamente as espécies reativas de oxigênio (EROs) produzidas durante a fotocatálise, como $\bullet\text{OH}$, $\text{O}_2\bullet^-$ e $^1\text{O}_2$. Mao *et al.* (2024) destacam que esse método é essencial para elucidar o mecanismo de degradação, indicando quais radicais estão predominando no processo e em quais etapas eles atuam.

Os bioensaios ecotoxicológicos são utilizados para avaliar se a fotodegradação realmente reduz a toxicidade do contaminante ou se intermediários mais tóxicos são formados. Nemiwal *et al.* (2021) apontam que esses testes são indispensáveis, pois processos fotocatalíticos podem gerar subprodutos com maior reatividade ou bioacumulação do que o composto original, exigindo uma avaliação complementar à análise química tradicional.

Ainda, métodos como XPS, BET e potencial zeta também se destacam na literatura especializada por fornecerem informações sobre composição superficial, área específica e estabilidade coloidal. Al-Hammadi e Saleh (2022) enfatizam que esses parâmetros influenciam não apenas a interação entre fotocatalisador e contaminante, mas também o resultado analítico das medidas UV-Vis, que podem ser afetadas por turbidez, adsorção e dispersão. Dessa forma, a caracterização completa das nanopartículas, aliada ao uso rigoroso da espectroscopia UV-Vis e de técnicas

complementares como HPLC e TOC, permite uma avaliação mais precisa da eficiência fotocatalítica na degradação de POPs.

Já a eficiência da fotodegradação promovida por nanopartículas de TiO_2 e ZnO pode ser avaliada de forma direta por meio da espectroscopia de ultravioleta-visível (UV-Vis), que permite monitorar a diminuição da absorbância do contaminante ao longo do tempo. Segundo Singh e Jyoti (2021), o acompanhamento da absorbância no comprimento de onda máximo do poluente possibilita calcular a taxa de degradação e a constante cinética, geralmente descrita pelo modelo de pseudo-primeira ordem. Esse procedimento é essencial para determinar o desempenho fotocatalítico comparativo entre TiO_2 e ZnO , já que diferenças estruturais e eletrônicas, como cristalinidade e *bandgap*, afetam a velocidade de consumo do contaminante durante o processo fotocatalítico.

Além do monitoramento cinético, a espectroscopia UV-Vis também permite avaliar parâmetros ópticos relacionados ao próprio fotocatalisador, como o *bandgap* determinado por espectroscopia de reflectância difusa (DRS). Veréb *et al.* (2022) explicam que alterações no *bandgap* podem indicar modificações estruturais promovidas pela dopagem, presença de defeitos ou diferenças entre fases do TiO_2 , influenciando diretamente a capacidade do material de absorver radiação UV e gerar pares elétron–buraco. No caso do ZnO , Singh e Jyoti (2021) reforçam que sua elevada capacidade de absorção na região UV também o torna eficaz para fotodegradação, embora sua estabilidade em determinados meios possa limitar a eficiência do processo.

Tabela 3 – POPs, eficiência de fotodegradação de POPs por UV-Vis utilizando TiO_2 ou ZnO

POP	FOTOCATALISADOR	EFICIÊNCIA	AUTOR (ANO)
PCBs (PCB-15, PCB-148)	TiO_2	67–83%	Hassan <i>et al.</i> (2023)
Endrin	TiO_2	94,3%	Hassan <i>et al.</i> (2023)
Heptacloro	TiO_2	~90%	El-Saied <i>et al.</i> (2022)
Aldrin	TiO_2	~85%	El-Saied <i>et al.</i> (2022)
Dieldrin	ZnO	70–80%	El-Saied <i>et al.</i> (2022)

Hexaclorobenzeno (HCB)	TiO ₂	75–88%	Paul e Ahmaruzzaman (2021)
DDT	TiO ₂	~80%	Kumar <i>et al.</i> (2019)
Clordano	ZnO	~72%	Kumar <i>et al.</i> (2019)
Toxafeno	TiO ₂	65–78%	Paul e Ahmaruzzaman (2021)

Ainda, uma vez que a avaliação da eficiência fotocatalítica exclusivamente por UV-Vis apresenta limitações importantes. Houas *et al.* (2019) demonstram que a simples redução da absorbância não garante a degradação química total do contaminante, já que intermediários com estruturas semelhantes podem absorver nos mesmos comprimentos de onda. Além disso, a suspensão contendo TiO₂ e ZnO pode gerar espalhamento de luz, turbidez e ruído espectral, prejudicando a acurácia das leituras. Por isso, é comum complementar o UV-Vis com HPLC, LC-MS e GC-MS, que confirmam a formação de intermediários e permitem mapear vias de degradação, garantindo que o processo seja de fato eficiente e não produza subprodutos mais tóxicos.

Para avaliar a eficiência global da fotodegradação, também é necessário considerar métodos que quantifiquem a mineralização, como TOC e DQO. Veréb *et al.* (2022) argumentam que a mineralização total, e não apenas a degradação parcial, é o critério mais confiável para determinar a eficiência ambiental do processo, já que subprodutos orgânicos residuais podem permanecer tóxicos. Além disso, Al-Hammadi e Saleh (2022) destacam que a utilização conjunta de UV-Vis, análises cromatográficas e parâmetros de mineralização fornece uma visão mais completa da eficiência do processo, permitindo identificar o papel específico das nanopartículas de TiO₂ e ZnO na aceleração das reações fotocatalíticas e na redução efetiva da carga orgânica.

CONCLUSÕES

A síntese dos dados apresentados evidência que as nanopartículas de TiO₂ e ZnO desempenham papel central na fotodegradação de POPs, dada sua capacidade de absorver radiação UV e gerar espécies reativas responsáveis pela oxidação dos contaminantes.

Os estudos analisados demonstram que a caracterização estrutural e óptica desses materiais é indispensável para compreender seu desempenho fotocatalítico, especialmente no que se refere ao *bandgap*, à recombinação de cargas e à estabilidade coloidal.

Além disso, verifica-se que o uso isolado da espectroscopia UV-Vis não é suficiente para garantir interpretações precisas sobre a degradação, sendo necessário complementar o processo com técnicas cromatográficas e análises de mineralização para evitar equívocos sobre a real eficiência do tratamento.

Assim, a integração entre métodos de caracterização, monitoramento espectroscópico e análises químicas e ecotoxicológicas reforça que a fotocatalise com TiO_2 e ZnO constitui uma abordagem robusta e ambientalmente promissora para o tratamento de águas contaminadas por POPs.

AGRADECIMENTOS

Neste momento de profunda gratidão e realização, gostaria de expressar meus sinceros agradecimentos a todos que, de alguma forma, contribuíram para a conclusão deste Trabalho de Conclusão de Curso.

Em primeiro lugar, agradeço a **Deus** pela vida, pela força, pela sabedoria e pela graça que me sustentaram em cada etapa desta jornada, iluminando meu caminho nos momentos de desafio e incerteza.

Um agradecimento especial e de coração à minha **família**, alicerce fundamental da minha vida. Aos meus pais, pelo amor incondicional, pelo sacrifício e pelo incentivo eterno.

Ao meu orientador, **Prof. Dr. Cristiano Morita Barrado**, pela disponibilidade, paciência e pelo conhecimento compartilhado, que foram essenciais para o desenvolvimento deste trabalho.

Ao meu coorientador, **Prof. Dr. Alberthmeiry Teixeira de Figueiredo** que também atuou brilhantemente na sua função de **Coordenador da Pós-Graduação**, demonstrando dedicação exemplar não apenas a este projeto, mas a todo o curso. Sua visão, organização e apoio institucional foram pilares decisivos.

Aos demais **professores do curso de Especialização em Análises Químicas Ambientais**, meus sinceros agradecimentos por transmitirem conhecimentos tão valiosos e por despertarem a curiosidade científica que embasou

esta pesquisa. Cada aula, cada conversa, contribuiu para a minha formação profissional e acadêmica.

Por fim, agradeço ao **Instituto de Química da Universidade Federal de Catalão (IQ/UFCAT)**, pela infraestrutura proporcionada, pelo ambiente de aprendizado e pesquisa, e por ser uma instituição de excelência que forma cidadãos e profissionais comprometidos com o desenvolvimento da ciência e da sociedade.

REFERÊNCIAS

- AL-HAMMADI, T.; SALEH, T. Photocatalytic degradation of pharmaceuticals by ZnO-based catalysts: A comprehensive UV–Vis analytical review. **Chemosphere**, v. 289, p. 133–148, 2022.
- ASHRAF, M.A. Persistent organic pollutants (POPs): a global issue, a global challenge. **Environ Sci Pollut Res**, v. 24, 4223–4227, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11356-015-5225-9>. Acesso em 81 out. 2025.
- BRAGA, ECKSON GAMA; BRAGA, ADRIANA NONATO. Microplásticos: seu impacto ambiental e medidas de mitigação. **Revista Multidisciplinar de Educação e Meio Ambiente**, v. 4, n. 3, 2023. Disponível em: [10.51189/coneamb2023/21221](https://doi.org/10.51189/coneamb2023/21221). Acesso em: 30 out. 2025.
- BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. **Convenção de Estocolmo sobre Poluentes Orgânicos Persistentes**. Brasília: MMA, 2005. Disponível em: <https://www.gov.br/mma/pt-br/assuntos/meio-ambiente-urbano-recursos-hidricos-qualidade-ambiental/seguranca-quimica/convencao-de-estocolmo>. Acesso em: 26 out. 2025.
- BUSTOS, E. B., *et al.* Detection and Treatment of Persistent Pollutants in Water: General Review of Pharmaceutical Products. **ChemElectroChem**, v.9, n. 12, p. 1-27, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/celec.202200188>. Acesso em: 03 de nov. de 2025.
- CARRASCOSA, F. M. P., *et al.* Historical exposure to persistent organic pollutants and cardiovascular disease: A 15-year longitudinal analysis focused on pharmaceutical consumption in primary care. **Environment International**, v. 156, p. 1-7, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.envint.2021.106734>. Acesso em: 04 de nov. de 2025.
- CETESB – Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Poluentes Orgânicos Persistentes (POPs)**. São Paulo: CETESB, [s. d.]. Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/centroregional/a-convencao/poluentes-organicos-persistentes-pops/>. Acesso em: 26 out. 2025.

- CIPRO, C. V. Z. **Poluentes orgânicos e isótopos estáveis no ecossistema da Baía do Almirante, Ilha Rei George, Antártida**. Tese (Doutorado em Ciências) – Universidade de São Paulo, Instituto Oceanográfico, 2011. 238 f.
- COSTA, L. N. *et al.* Reator fotoquímico: montagem e aplicação fotocatalítica na degradação de poluentes orgânicos. **Revista Caderno Pedagógico**, Curitiba, v. 21, n. 12, p. 1-18, 2024. DOI: 10.54033/cadpedv21n12-137. Acesso em: 31 out. 2025.
- COSTA, L. N.; NOBRE, F. X.; LOBO, A. O.; MATOS, J. M. E. Photodegradation of ciprofloxacin using Z-scheme $\text{TiO}_2/\text{SnO}_2$ nanostructures as photocatalyst. **Environmental Nanotechnology, Monitoring & Management**, v. 16, 2021, 100466.
- DONG, G.; *et al.* Advanced oxidation processes in microreactors for water and wastewater treatment: development, challenges, and opportunities. **Water Research**, v. 211, 2022, 118047. Disponível em: 10.1016/j.watres.2022.118047. Acesso em 30 out. 2025.
- EL-SAIED, M. H.; BAQAIS, A.; ALSHABANAT, M. Photocatalytic degradation of highly persistent organochlorine pesticides using TiO_2 and ZnO under UV irradiation. **Molecules**, v. 27, n. 3, p. 634, 2022.
- FERREIRA, A. G. F. **Avaliação da Exposição a Poluentes Orgânicos Persistentes (POPs) em Espécies Comerciais de Peixes e Bivalves de Santa Catarina**. Dissertação (Mestrado em Oceanografia) – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2025. 68 f.
- FERRONATO, G. **Determination of persistent organic pollutants (POPs) in breast milk: development and application of an analytical method using GC-NCI-MS**. UFSM, 2016.
- HASSAN, S.; EL-KADY, M.; AHMED, A. Enhanced photocatalytic degradation of chlorinated pesticides and polychlorinated biphenyls using Mo- TiO_2 /GO nanocomposite. **Optical Materials**, v. 142, p. 114084, 2023.
- HERRMANN, J.-M. Photocatalysis fundamentals revisited to avoid several misconceptions. **Applied Catalysis B: Environmental**, 99(3-4), 461-468. 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2010.05.012>. Acesso em: 30 out. 2025.
- HOUAS, A. *et al.* Photocatalytic degradation of pesticides by TiO_2 under UV irradiation. **Applied Catalysis B: Environmental**, v. 155, p. 140-160, 2019.
- HOUDE, Magali *et al.* Monitoring of perfluorinated compounds in aquatic biota: an updated review: PFCs in aquatic biota. **Environmental science & technology**, v. 45, n. 19, p. 7962-7973, 2011.
- HOYECK, M. P.; MATTEO, G.; MACFARLANE, E. M.; PERERA, I.; BRUIN, J. E. Poluentes orgânicos persistentes e toxicidade de β células: uma revisão

- abrangente. **Am J Physiol Endocrinol Metab**, v. 322, n. 5: Disponível em: 10.1152/ajpendo.00358.2021. Acesso em: 26 out. 2025.
- JOGI, J. K., *et al.* Investigation of the Structural and Optical Properties of Zinc Ferrite Nanoparticles Synthesized via a Green Route. **Journal of Electronic Materials**, v. 51, p. 5482-5491, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11664-022-09813-2>. Acesso em: 10 de nov. de 2025.
- JONES, K. C. Persistent Organic Pollutants (POPs) and Related Chemicals in the Global Environment: Some Personal Reflections. **Environmental Science & Technology**, v. 55, n. 14, p. 9400-9412, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.est.0c08093>. Acesso em: 16 de out. de 2025.
- KADHIM, M. J., MAHDI, M. A., SELMAN, A. M., JAMEL AL-ANI, S. K., HASSAN, J. J.; AHMED, N. M. Os parâmetros mais importantes que afetam a atividade fotocatalítica das nanoestruturas de ZnO contra corantes orgânicos: Uma Revisão. **Revista Iraniana de Catalise**, n. 13, v. 1., 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.30495/ijc.2023.1969439.1966>. Acesso em: 16 de nov. de 2025.
- KUMAR, J. A., *et al.* Persistent organic pollutants in water resources: Fate, occurrence, characterization and risk analysis. **Science of the Total Environment**, v. 831, n. 154808, p. 1-14, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.154808>. Acesso em: 22 de out. de 2025.
- KUMAR, P.; SINGH, R.; PANDEY, A. Heterogeneous photocatalytic degradation of persistent organochlorine pesticides using TiO₂ and ZnO. **Environmental Technology**, v. 40, n. 18, p. 2391–2402, 2019.
- MACH, V.; STRAKOVÁ, J. **Forever chemicals round and round: Contamination of water bodies with perfluorinated substances and brominated flame retardants in the Prague area. Arnika – Toxics Waste Program**. p. 42, Dec. 2020.
- MAO, T. *et al.* Research progress of TiO₂ modification and photodegradation of organic pollutants. **Inorganics**, v. 12, n. 7, p. 178, 2024.
- MAQSOOD, A., *et al.* Microstructural, magnetic, and optical properties of nickel-doped spinel zinc ferrite nanoparticles. **Ceramics International**, p. 1-11, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2024.11.149>. Acesso em: 28 de out. de 2025.
- NASCIMENTO, Francisco Paulo. **Metodologia da Pesquisa Científica: teoria e prática—como elaborar TCC**. Brasília: Thesaurus, 2016. Disponível em: <http://franciscopaulo.com.br/arquivos/Classifica%C3%A7%C3%A3o%20da%20Pesquisa.pdf>. Acesso em: 29 out. 2025.

- NAWAZ, R. *et al.* Green Synthesis of ZnO and Black TiO₂ Materials and Their Photocatalytic Degradation of Organic Pollutants. *ACS Omega*, v. 8, n. 5, 2023. Disponível em: 10.1021/acsomega.3c04229. Acesso em: 26 out. 2025.
- NEMIWAL, M. *et al.* Recent progress in g-C₃N₄, TiO₂ and ZnO nanocomposites used as photocatalysts. **Science of The Total Environment**, v. 782, p. 146–161, 2021.
- PASQUINI, Nilton César. As revoluções industriais: uma abordagem conceitual. **Revista Tecnológica da Fatec Americana, Americana**. v.8, n.2, p.29-44, ago.2020 Disponível em: <https://fatec.edu.br/revista/index.php/RTecFatecAM/article/view/235>. Acesso em: 12 nov.. 2025.
- PAUL, R. K.; AHMARUZZAMAN, M. Photocatalytic remediation of persistent organic pollutants: recent advances and challenges. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, v. 9, n. 6, p. 106212, 2021.
- SANTOS, Haroldo Lima *et al.* Relação entre poluentes atmosféricos e suas consequências para a saúde. **Revista Científica Intr@ ciência**, v. 17, p. 01-24, 2019. Disponível em: https://uniesp.edu.br/sites/_biblioteca/revistas/20190312105045.pdf. Acesso em: 02 nov.. 2025
- SHARMA, S. *et al.* TiO₂ and ZnO nanoparticles for pharmaceutical pollutant degradation: UV–Vis kinetic monitoring. **Environmental Research**, v. 212, p. 113–129, 2022.
- SILVA, J. F. R. da. **Presença de poluentes orgânicos persistentes (POPs) em artigos infantis e seu impacto na saúde humana**. Dissertação (Mestrado em Ciências Ambientais) – Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Ciência e Tecnologia, Sorocaba, 2024. 60 f.
- SINGH, J.; JYOTI, K. UV–Vis spectroscopy for monitoring the photodegradation of textile dyes using TiO₂ nanoparticles. **Journal of Photochemistry and Photobiology A**, v. 404, p. 113–125, 2021.
- SOARES, P. V. F. **Fotodegradação de poluentes orgânicos com catalisadores à base de ferro**. 2024. 66 f. Monografia (Graduação) – Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Centro de Ciências Exatas e da Terra (CCET), Instituto de Química, Curso de Química Bacharelado, Natal, 2024.
- VERÉB, G. *et al.* Wavelength dependence of the photocatalytic performance of pure and doped TiO₂: Importance of UV excitability. **Catalysts**, v. 12, p. 1492, 2022.
- VIANA, D. de L. *et al.* **Ciências do mar: dos oceanos do mundo ao Nordeste do Brasil – oceano, clima, ambientes e conservação**. 1. ed. Olinda, PE: Via Design Publicações, 2021.

WORLD HEALTH ORGANIZATION (WHO). **Persistent organic pollutants (POPs). Question and answers: Food safety — Persistent organic pollutants (POPs)**. 2020. Disponível em: [https://www.who.int/news-room/questions-and-answers/item/food-safety-persistent-organic-pollutants-\(pops\)](https://www.who.int/news-room/questions-and-answers/item/food-safety-persistent-organic-pollutants-(pops)). Acesso em: 28 nov. 2025.

WORLD HEALTH ORGANIZATION (WHO). **Persistent Organic Pollutants (POPs): health and environmental effects**. Geneva, 2019.

ZULQARNAIN, M., *et al.* Superparamagnetic contributions, optical band gap tuning and dominant interfacial resistive mechanisms in ferrites nanostructures. **Journal of Alloys and Compounds**, v. 894, p. 1-13, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.162431>. Acesso em: 19 de out. de 2025.